

整理番号 2021M-107

補助事業名 2021年度公設工業試験研究所等が主体的に取り組む共同研究補助事業

補助事業者名 和歌山県

1 補助事業の概要

(1) 事業の目的

化合物の構造と物性を関連づける定量的構造物性相関(QSPR)の手法は開発加速化のツールとして有用ではあるが、特定モデルに限定され、新分野の材料開発に対しては有効に活用できない場合も多い。本事業では、機械学習機能を有するQSPRソフトを導入し、先端材料の一つである有機電子材料をターゲットに、化学構造とその物理物性等の関連モデルの構築を行う。本事業の中で、候補化合物、学習方法、評価物性値の選定などを種々検討し、有効な予測モデル構築に必要な手法を確立することを目的とする。

(2) 実施内容

① 研究開発の実施（機械学習による有機電子材料の物性予測モデルの構築）

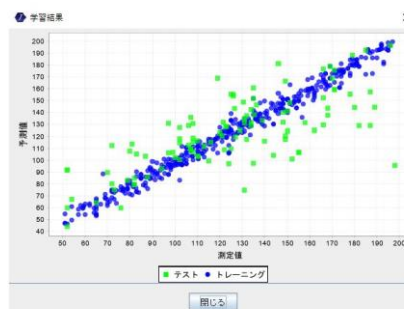
本事業で導入したソフトウェア：定量的構造物性相関（機械学習）システム

(<https://www.wakayama-kg.jp/kiki/category/cat/644.html>)

有機電子材料をターゲットに、機械学習機能を有するQSPRソフトウェアを活用し、その化学構造と諸物性の相関関係についての予測モデル作成を行った。各種既存データベースや和歌山大学で開発した材料データを活用し、各種シミュレーションパラメータを変化させながら、化学構造と物性値との相関モデルの構築を行った。



導入したシステム



作成した学習モデルの結果

②導入システム及び研究成果の普及活動

ア 計算化学セミナー ～ 機械学習QSPR（定量的構造物性相関）の紹介 ～

日 時：令和3年9月9日（木）14:00～15:30

開催方法：オンライン形式（Microsoft Teams）

<https://www.wakayama-kg.jp/news/2021/09/post-196.html>

内 容：深層学習を用いた機械学習QSPR機能の概要とデモンストレーション

（株式会社JSOL 前田 達也 氏）

工業技術センターでの計算化学の取組

（和歌山県工業技術センター 化学技術部 森 一）

イ 計算化学セミナー ～ 機械学習QSPR（定量的構造物性相関）の活用事例 ～

日 時：令和4年2月17日（木）14:00～15:40

開催方法：オンライン形式（Microsoft Teams）

<https://www.wakayama-kg.jp/news/2022/02/post-205.html>

内 容：機械学習の概要と化学系分野での活用事例紹介

（和歌山県工業技術センター 化学技術部 森 一）

機械学習QSPRによる有機材料の物性予測モデルの作成

（和歌山県工業技術センター 化学技術部 芳井 朝美）

事務連絡（機械学習QSPRシステムの今後の運用予定等）

（和歌山県工業技術センター 化学技術部 森 一）



計算化学セミナーの様子

2 予想される事業実施効果

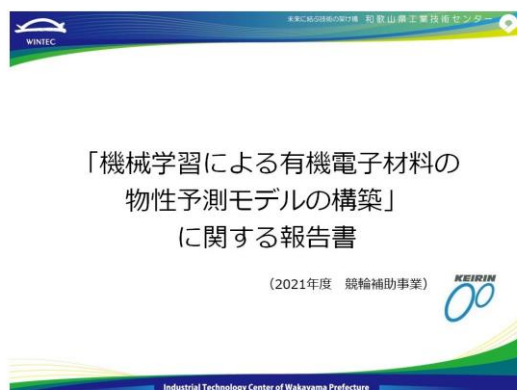
有機材料開発に関連した機械学習システムは、今回実施した有機電子材料だけでなく、高分子材料や複合材料など様々な化合物への展開が可能である。そのため、本事業で実施した内容は、材料分野を中心に多くの企業ニーズへの対応を可能とするものと期待される。種々の企業での高付加価値製品の効率的な開発が促進されることで、機械工業分野の振興に貢献できると期待される。

3 補助事業に係る成果物

(1) 補助事業により作成したもの

和歌山県工業技術センターホームページ

「機械学習による定量的構造物性相関 (QSPR) を活用した有機電子材料の物性予測モデルの構築」に関する報告書 (<https://www.wakayama-kg.jp/ybg/rnd/>)



(2) (1) 以外で当事業において作成したもの

・ 計算化学セミナー 講演資料

日 時：令和3年9月9日（木）14:00～15:30

開催方法：オンライン形式（Microsoft Teams）

・ 計算化学セミナー 講演資料

日 時：令和4年2月17日（木）14:00～15:40

開催方法：オンライン形式（Microsoft Teams）

4 事業内容についての問い合わせ先

団体名： 和歌山県工業技術センター（ワカヤマケンコウギョウギジュツセンター）

住所： 〒649-6261

和歌山県和歌山市小倉60番地

代表者： 所長 四元 弘毅（ヨツモト ヒロキ）

担当部署： 化学技術部（カガクギジュツブ）

担当者名： 部長 森 一（モリ ハジメ）

電話番号： 073-477-1271

F A X： 073-477-2880

E-mail： wintec-jka@wakayama-kg.jp

U R L： <http://www.wakayama-kg.jp/>